文章编号:0253-2239(2002)02-0190-06

光电阵列探测器对色散型光谱仪的光谱分辨极限 及波长准确性的影响*

胡 松 陈伟民** 温志渝 杨桂荣 陈 刚 黄尚廉

(重庆大学光电工程学院,重庆400044)

摘要: 针对光电阵列探测器对色散型光谱仪的光谱分辨极限和波长准确性可能造成的不利影响,分别从空域和 频域两方面分析了阵列探测器的光敏元中心距、谱线的宽度及谱线与光敏元的相对位置对分辨极限及波长准确性 的影响,并通过计算机模拟定量地给出了在不同情况下其分辨极限和波长准确性的大小,得出了高斯型谱线的宽 度小于光敏元中心距的5倍时,光谱仪系统不能同时提高其光谱分辨极限和波长准确性的结论。

关键词: 光谱仪器;光谱分辨极限;波长准确性;阵列器件;频谱分析

中图分类号:TH744.1 **文献标识码**:A

1 引 言

光谱分辨极限和波长准确性是衡量光谱仪器性 能的重要参数,它们都与其接收系统有关。在采用 阵列探测器作为接收系统已成为现代光谱仪发展主 流的今天,对其设计方法与理论进行深入的研究,将 有助于提高其整体性能,为现代分析技术提供更优 质的光谱分析手段。

由于光电阵列探测器是由一个个相互独立的、 具有一定宽度的光敏元组成,用它接收光谱信号时, 每个光敏元都只输出其对应空间位置的谱线信息。 显然,它与传统机械扫描式光电光谱仪的区别在于 它的探测间隔是由光敏元中心距决定的固定值,而 机械扫描式则可通过调整扫描速度来控制探测的步 长。因此,光电阵列探测器对光谱信号的获取就可 能因为探测器过于稀疏而不能获取足够的光谱信 息,使得测量结果与实际情况存在误差,从而导致色 散型光谱仪分辨极限及其波长定位精度下降,因此 有必要对这种影响进行深入研究。

2 光谱仪器的光谱分辨极限及波长准 确性

任何色散型光谱仪都可简化为如图 1 所示的等

* * 联系人 E-mail weimchen@cta.cq.cn 收稿日期 2000-08-21;收到修改稿日期 2000-10-24 效结构,主要由照明系统、分光系统、接收系统三部 分组成。它的基本工作原理是由狭缝发出的光束经 过准直物镜,变为平行光束射入色散元件;由于色散 元件的作用,进入系统的单束复色光被分解为多束 单色光,并被成像物镜按波长的顺序成像于透镜焦 面处。此时,一个由复色光照明的狭缝经过分光系 统后变为若干个单色的狭缝像,这单色的狭缝像即 为通常所说的谱线。光谱仪器的分辨极限即光谱仪 器刚好能分辨的两条谱线的波长间隔 $\Delta \lambda$,其对应的 空间间隔 δ_x 可称为光谱仪的空间分辨极限,其放大 后的示意图如图 2 所示(图中已将坐标原点平移到 第一条谱线的中心处)。设 dl/d\lambda 为光谱仪器的线 色散率,则光谱分辨极限 δ_x 和空间分辨极限 δ_x 有 以下关系^[1]:

$$\delta_{\lambda} = \frac{\delta_x}{\mathrm{d}l/\mathrm{d}\lambda}.$$
 (1)

从(1)式可以看出,要提高光谱仪的光谱分辨极限, 可以通过增大光谱仪的线色散率或提高光谱仪的空 间分辨极限来达到。但是,在光谱仪线色散率一定



Fig. 1 Schematic diagram of spectrometer

^{*} 国家自然科学基金(69836050)及教育部科学技术基金 (99105)资助课题。

时,光谱仪空间分辨极限完全受制于 δ_x 。但由瑞利 判据知, δ_x 还与谱线的轮廓和探测系统的灵敏度有 关。

设两条谱线的轮廓分布是一致的,位于光敏元 中心的谱线的空间轮廓分布为g(x),另一条谱线 与其相距 Δx [如图 $\chi(x)$ 所示],则在探测器表面上 的合成谱轮廓分布 f(x) 如图 $\chi(c)$]为:

 $f(x) = g(x) + g(x - \Delta x).$ (2)





瑞利认为,两条轮廓分布相同的谱线刚好能被 肉眼分辨的情况是它们的最大值和最小值重合,此 时合成光谱波峰波谷差 Δf 与波峰 f_m 的比值约为 0.1 如图 χ c)所示]。而光电探测器的灵敏度一般 高于 5%,所以只要(2)式中合成谱线轮廓强度的峰 值与谷值相差 5%,即 $\Delta f/f_m = 0.05$,那么从灵敏度 的角度看,两条谱线就能分辨,即光电探测器的光谱 分辨极限大于肉眼的分辨极限,因此(1)式中的 δ_x 是接收系统空间特性与瑞利准则的共同结果。

而对于单条谱线而言,一般可将其空间轮廓分 布近似为高斯分布。设 *d* 为谱线的空间半宽度,*x*_λ 为谱线中心的空间位置,则任一谱线的归一化强度 可表示为:

$$g(x - x_{\lambda}) = \exp\left[-\left(\frac{x - x_{\lambda}}{d/2}\right)^{2}\right]. \quad (3)$$

设 f_2 为色散型光谱仪的成像物镜焦距 , $q(\lambda)$ 是波长为 λ 的单色光经光栅后的衍射角 $\delta\lambda$ 为谱线 的波长半宽 ,则 x_λ 和 d 可分别表示为:

$$x_{\lambda} = f'_{2} \tan[\varphi(\lambda)], \qquad (3a)$$

$$d = \frac{\mathrm{d}l}{\mathrm{d}\lambda} \delta\lambda \,. \tag{3b}$$

由上式可知,通过探测它的空间位置 x_{λ} 便可知被测 光谱线的中心波长 λ ,而 x_{λ} 也与接收系统的空间特 性有关。当采用光电阵列探测器时 ,其空间特性主要 包含光敏元宽度、中心距等参数。

3 光电阵列探测器对波长准确性的影响

对波长准确性的讨论应基于谱线的波长坐标 系 如图 3(a)所示,但此时将会涉及到光谱仪的光 学系统的诸多参数,使问题复杂化。不过,当光学系 统的参数确定后,谱线的波长坐标与其空间位置坐 标是一一对应的,因此本文对波长准确性的讨论将 在图 3 所示的谱线空间位置坐标系中进行。



Fig. 3 Sampling of a spectral line

如图 $\mathfrak{X}(a)$,光电阵列探测器对一条宽度远大于 光敏元中心距的谱线的探测是通过它的各光敏元分 别将在空间连续分布的光强信号 g(x)变成如图 3 (b)所示的在空间上离散的电信号 g(x)。设 b 为 光敏元的宽度 ,*a* 为光敏元的中心距 , x_0 为光敏元 中心与谱线 g(x)峰值位置的偏差 ,且 $|x_0| \le a/2$, 则离散信号为^[2]:

$$g_{s}(x) = \left[g(x)\frac{1}{b}\operatorname{rect}\left(\frac{x}{b}\right)\right]\frac{1}{a}\operatorname{comb}\left(\frac{x-x_{0}}{a}\right)\right].$$
(4)

该式表示的含义是:光电阵列探测器沿x方向,以探测宽度 b 及间隔a进行探测。

从图 \mathfrak{X} b)可以看出,如果直接以光敏元中心距 x_0 作为谱线中心,则由于抛弃了相邻光敏元提供的 信息,会产生 $w = x_0$ 的误差。而当谱线中心处于两 光敏元之间时,w 最大可达 a/\mathfrak{X} 半个中心距)。为减 小误差,在理论上可以无限减小光敏元中心距 a,以 达到足够的精度。但是,由于光电阵列探测器制造工 艺的限制,光敏元中心距的减小是有限度的。此时, 如能利用相邻光敏元输出信息进行插值计算是增大 信息量、提高中心提取精度的有效方法。以 sinc 插值 法为例,设 g'(x)是由阵列探测器输出的离散信号 恢复出的谱线:

$$g'_{r}(x) = \sum_{m=-1}^{1} g_{s}(ma + x_{0}) \sin\left(\frac{x - ma - x_{0}}{a}\right),$$

(5)

其相应的中心位置 x′₀为:

$$x'_{0} = x |_{\max[g'(x)]}.$$

由上两式及图 \mathfrak{X} b)可以看出,恢复出的谱线中心位 置与实际谱线和光敏元中心的相对位置 x_0 、探测器 的中心距 a、谱线的空间半宽 d 有关。设坐标原点设 定在原始谱线中心处,故原始谱线的中心位置为 0, 则经插值细分后的波长准确性由 w 变为 w':

$$w' = x'_0 - 0 = x'_0.$$
 (6)

为直观、定量地看出 a, d, x_0 这些因素是如何影响 波长准确性的 ,取谱线的空间半宽与光敏元中心距 的比值 d/a 为一变量 ,使 d/a 的取值范围为 0.5 ~ 3 ,同时令 x_0 在 -a/2 ,a/2]之间变动 ,用(5)式对 波长准确性进行数字仿真计算 结果如图 4 所示。

图 4 中横坐标表示谱线中心与光敏元中心的相 对位置 纵坐标表示以光敏元中心距为标准的相对 波长准确性。由图中可以看出 ,在 $d/a \ge 2.5$ 后已具 有很高的准确性。从图中还可看出 ,波长的准确性随 着 x_0 变化而产生起伏 即波长准确性与谱线和光敏 元的相对位置有关。

需说明的是 :*d*/*a* 取值范围的下限之所以取0.5 是因为此时相当于谱线全宽恰好与光敏元的中心距 相等,如果谱线宽度再减小就会出现谱线全宽窄于 阵列探测器中心距的现象,此时就只有以光敏元的 中心来表示谱线的中心,无法通过插值算法来准确 定位谱线中心,其最大极限误差可达 a/2。d/a 的上 限取为3是因为由图4可以看出,通过 sinc 插值后波 长准确性随 d/a 增大而变好,当 d/a 大于3后,其误 差基本为0,没有再进行分析的必要。



Fig. 4 w' versus x_0 (sinc interpolation) 1:d/a = 0.5; 2:d/a = 1 3:d/a = 1.5;4:d/a = 2;5:d/a = 2.5; 6:d/a = 3

4 阵列探测器对光谱仪分辨极限的影响

对光谱分辨极限的研究实际上是研究由两条谱 线形成的合成光谱。此时,不但要考虑阵列探测器 对单一谱线探测所产生的波长准确性问题,还要考 虑两条谱线由于重叠而造成的相互影响,这种影响 的大小体现在 Δ*x* 中。所以,对复合光谱而言,两条 谱线与最近光敏元的相对位置、谱线的空间半宽、光 敏元的中心距 *a*、两条谱线的间隔 Δ*x* 都可能会对 其造成影响。由于这些因素多,为简化计算、利于比 较,设第一条谱线中心固定在某一光敏元的中心上、 且为原点,则阵列探测器获得的合成光谱的离散输 出为:

$$f_{s}(x) = \left[f(x) \frac{1}{b} \operatorname{rect}\left(\frac{x}{b}\right) \right] \frac{1}{a} \operatorname{comb}\left(\frac{x}{a}\right) \right].$$
(7)

同样用 sinc 内插法来恢复合成光谱,有:

$$f'_{r}(x) = \sum_{m=-1}^{1} f_{s}(ma) \sin\left(\frac{x-ma}{a}\right).$$
 (8)

若设 x_1 、 x_2 分别为两条原始谱线的中心位置, x_1' 、 x_2' 分别为合成光谱重建后两条谱线的中心位 置 $\Delta x'$ 为重建合成光谱中两谱线的空间间隔,则可 定义一个参数 e 表示对两条谱线的空间分辨误差: $e = \Delta x' - \Delta x. \tag{9}$

为能直观地看出各种因素变化对空间分辨的 影响,让 *d*/*a* 的取值范围为 0.5 ~ 3,令 Δ*x* 为自变 量,通过计算机模拟观察它们对空间分辨误差的影 响,结果如图 5 所示。从图 5 中可以看出三点:

首先对每条误差曲线,当 Δx 减小到某个值时 (如图 5 中的小圆圈所示),其误差会陡然增大,表明 此时阵列探测器已不能分辨出两谱线,而这时的 Δx 值即为光谱仪的空间分辨极限。从图 5 中可以看出, d/a越小, e越大,从而导致光谱分辨极限降低。



Fig. 5 e versus Δx . 1. \Box : d/a = 0.5; 2. Δ : d/a = 1; 3. \times :d/a = 1.5; 4. --- :d/a = 2; 5. ---- :d/a = 2.5; 6. ----- :d/a = 3

其次,比较图 5 与图 4 可知,采用阵列探测器的 光谱仪其光谱分辨极限和波长准确性是相互矛盾 的。

此外,空间分辨误差 e 随 Δx 的变化而出现周期性起伏,且一个周期内的变化与图 4 十分相似,这是因为 Δx 实际上可表示为:

$$\Delta x = ma + x_0 , \qquad (10)$$

即光敏元中心距 a 使 Δx 产生周期性的变化。从图 5 可以看出 随 Δx 的增大,误差曲线的振荡幅度逐渐 降低,并趋于稳定。由于误差产生的根源是两谱线的 波长准确性,因此两谱线距离的远近对误差的影响 实际上由两谱线波长准确性的影响所造成。

5 基于频域的分析及讨论

在前面对波长准确性的计算机模拟中看到,当 *d*/*a* ≥ 2.5 后,波长的准确性会相当高,在分辨极限 的计算机模拟中,当 *d*/*a* < 2.5 后,阵列探测器的采 用会降低光谱仪的分辨极限。但是,为什么会如此, 却无法从这种空域中的模拟看出。为此,从频域进行 分析来解释这些问题。

5.1 单一谱线的频谱分析

对(3)式坐标平移后进行傅里叶变换,可得原 始谱线的频谱分布为:

 $G(u) = 0.5d \sqrt{\pi} \exp[-(0.5\pi du)^2]$. (11)

由上式可知, $G[4/(\pi d)] = 0.018G(0) \approx 0$,即 可认为原始谱线的截止频率(即谱线半宽度)为 $4/\pi d$ 。从上式还可看出,谱线的空间宽度 d 越窄,它 的频谱宽度 $4/(\pi d)$ 越大,即高频成分越多。

对光电阵列探测器离散抽样输出信号(4)式进 行傅里叶变换并进行相应的计算,其频谱为^[3]:

$$G_{s}(u) = \sum_{k} \left\{ G\left(u - \frac{k}{a} \right) \text{sind} \left[b\left(u - \frac{k}{a} \right) \right] \right\} \times \exp\left(-i2\pi x_{0} \frac{k}{a} \right).$$
(12)

其频谱是以 1/a 为周期作无限重复,并且其第 k 级 谱还同时绕 u 轴旋转 $- 2\pi x_0 (k/a)$ 。设 d = 2a,则 G(u)的 - 1, 0, 1级谱如图 6 所示。从图 6 中可以看 出 此时零级谱的空间截止频率为 0.64/a,大于探 测器抽样率的一半[1/(2a)],由奈奎斯特(Nyquist) 抽样定理可知,此时 0 级谱与 ± 1 级谱会发生混叠, 导致所谓的欠抽样。由(12)式可知,除零级谱外,其 它各级谱都与 x_0 有关。此时如用一低通滤波器 R(u)提取 G(u)的零级谱:

$$G_{\rm r}(u) = G_{\rm s}(u) R(u),$$
 (13)

其中,
$$R(u) = \begin{cases} 1 & , \\ 0 & , \end{cases} |u| \leq 1/(2a), (14)$$
则 $G_{i}(u)$ 可以写为:

$$G_{r}(u) = G(u) \sin[b(u)] + \{G(u+1/a) \sin[b(u+1/a)] \exp[(i2\pi x_{0}/a) + \{G(u-1/a) \sin[b(u-1/a)]\} \exp[(-i2\pi x_{0}/a) |u| \leq 1/(2a).$$
(15)

上式即为原始谱线经阵列探测器抽样和低通滤波后的频谱,由此谱恢复出的原始谱线如(5)式所示。比较(5)式与(11)式可知,经阵列探测器抽样后的频 谱函数与原始的频谱函数有两点不同,一是(15)式 中多了后面两项,这是由于原始信号谱的截止频率 大于奈奎斯特频率 (13)式的零级谱中在 $\pm 1/(2a)$ 之外的成份将被滤掉,但是 ± 1 级谱在 $\pm 1/(2a)$ 之 内的频谱将会混入 G(u)中,致使其高频成分增加。 由于混入的频谱与 x_0 有关,因此在频谱混叠时,用 一低通滤波器不可能不失真地恢复出原始信号谱



Fig.6 Schematic of spectral domain of the G(u)(其他方法也不能),并且恢复出的频谱还将与 x_0 有 关。二是第一项虽然与原始信号谱最相似,但多了 sin(bu)项,这是由于抽样不是数学上的点,是有一 定宽度 b 所引起的。它对原始信号谱的作用是压制 其高频成分,而这在频谱混叠时对不失真恢复原始 信号谱有积极作用^[4]。

综上所述,要不失真地由低通滤波器恢复出原 始谱线的频谱,原始谱线的截止频率必须小于奈奎 斯特频率1/(2*a*),即4/(πd) \leq 1/(2*a*),也即*d*/*a* \geq 2.55,大约是一条谱线内至少要涵盖5个光敏元。这 与图4的仿真计算结果相吻合,并且解释了为什么 当*d*/*a* \geq 2.5后波长准确性会相当高。

5.2 合成谱的频谱分析

对(2)式进行傅里叶变换,以考察合成谱的频 谱,有:

F(u) = G(u) + G(u)exp(j2πΔxu). (16)
对上式进行一定计算、变形,可得:

 $F(u) = 2\cos(\pi \Delta x u)G(u)\exp(j\pi \Delta x u).(17)$ 对(7)式进行傅里叶变换 得:

$$F_{s}(u) = \sum_{k} \left\{ F\left(u - \frac{k}{a}\right) \operatorname{sinc}\left[b\left(u - \frac{k}{a}\right)\right] \right\}.$$
(18)

此式即为合成谱经过光电阵列探测器积分抽样后的 频谱分布。可以看出,抽样是否造成频谱混叠除与抽 样率有关外,就决定于合成谱的频谱分布 F(u),而 由(17)式可知,合成谱的频谱分布主要决定于单条 谱线的频谱分布 G(u)和由 Δx 决定的余弦项。

同样用(14)式的理想低通滤波器来对 $F_{s}(u)$ 进行滤波 ,有:

$$F_{r}(u) = F_{s}(u)R(u) = F(u) \sin(bu) \Big|_{-1(2a)}^{1/(2a)} + \sum_{\substack{n=-\infty\\(n\neq 0)}}^{+\infty} F(u-n/a) \sin(b(u-n/a)) \Big|_{-1(2a)}^{1/(2a)}.$$

由于(17)式中余弦项的引入使得频谱 F(u)出 现振荡,此时已不适于用截止频率的概念来分析合 成谱的频谱,为定量地分析合成谱的频谱混叠效应, 此处引入混淆误差的概念。混淆误差是指混淆能量 E,与滤波后信号能量 E,的比值,为:

$$r_{\rm a} = \frac{E_{\rm a}}{E_{\rm r}} , \qquad (20)$$

其中 E_{r} 和 E_{a} 分别为:

$$E_{r} = \int_{-1/2a}^{1/2a} |F_{r}(u)|^{2} du , \qquad (21a)$$

$$E_{a} = \int_{-1/(2a)}^{1/(2a)} \sum_{\substack{n=-\infty\\n\neq 0}}^{+\infty} \left| F\left(u - \frac{n}{a} \right) \sin\left(b\left(u - \frac{n}{a} \right) \right) \right|^{2} \mathrm{d}u.$$
(21b)

为能直观地看出不同情况对混淆误差的影响, 以 Δx 为自变量,考察 d/a 在 0.5 ~ 3 范围内变化 时,混淆误差的变化。通过计算机模拟,结果如图 7 所示。从图 7 中可以看出两点,1)随着 d/a 的增大, 混淆误差的总体趋势减小,在 $d/a \ge 2.5$ 后,混淆误 差已经很小,即此时由阵列探测器的抽样信号 $g_s(x)$ 恢复出的光谱信号与原始光谱信号已十分相 似,这就解释了为什么当 d/a < 2.5时,阵列探测器 的使用会导致光谱分辨极限下降。2)对一个恒定 d/a 值,其混淆误差随 Δx 的增大而逐渐振荡减小, 这与图 5 中分辨误差随 Δx 的增大也出现振荡减小 是相对应的。因为混淆误差大,恢复出的光谱信号与 原始信号的差异也大,导致波长准确性降低,最终使 分辨误差增大。这也解释了为什么当两条谱线的距 离靠近时,其分辨误差会增大。



Fig. 7 r_a - Δx curves. 1. d/a = 0.5 2. d/a = 1 3. d/a = 1.5 4. d/a = 2.5 6. d/a = 3

结束语 在色散型光谱仪中,如果采用阵列探测器 作为接收系统,则谱线太窄(小于光敏元中心距的5 倍),反而会降低系统的光谱分辨极限(与仅从探测 器灵敏度考虑的分辨极限相比)和波长准确性。其 原因是由于此时谱线的空间截止频率不满足由光敏 元中心距所决定的奈奎斯特抽样率所致。

传统的光电光谱仪在设计时,为提高光谱分辨极限,在光谱仪线色散率一定的情况下,都尽量减小谱线的空间宽度。但采用阵列探测器的光谱仪在谱线空间宽度与光敏元中心距的比值 *d*/*a* 减小到 2.5 后,虽然光谱仪的分辨极限会提高(相对比较),但光谱仪的波长准确性会随之降低。因此在对采用阵列探测器的光电光谱仪进行设计时,必须根据光谱仪对分辨极限和波长准确性的要求,从总体出发,考虑设计一

合适的谱线宽度 以满足光谱仪的总体性能要求。

参考文献

- [1] Wu G A. Design of Photo-Spectrometer(光谱仪器设计). Beijing Science Press ,1978(in Chinese)
- [2] Gasgil J D. Linear Optics · Fourier Optics · Optics(线性 光学 · 傅里叶光学 · 光学). Translated by Feng K Y, Beijing : Popular Education Press, 1981(in Chinese)
- [3] Wittenstein W, Fontanella J C, Newbery A R et al.. The definition of the OTF and the measurement of aliasing for sampled imaging systems. Optical Acta , 1982, 29(1):41 \sim 50
- [4] Park S K, Schowengerdt R, Kaczynski M A. Modulationtransfer-function analysis for sampled image systems. *Appl. Opt.*, 1984, 23(15) 2572~2582

Influence of Photo-Detecter Array on Resolution and Wavelength Accuracy of Spectrometer

Hu Song Chen Weimin Wen Zhiyu Yang Guirong Chen Gang Huang Shanglian (*College of Opto-Electronic Engineering*, *Chongqing University*, *Chongqing* 400044) (Received 21 August 2000; revised 24 October 2000)

Abstract: The influence of photo-detector array on the resolution and wavelength accuracy of the spectrometer is studied in both spatial-domain and frequency-domain. Main parameters of spectrometer, such as the center-distance of the photosensitive elements and width of spectral line etc., have been investigated deeply, and computational simulation is presented. A contradiction between resolution and wavelength accuracy is revealed when the width of one Gauss spectral line is less than five times of the center-distance of the photosensitive elements. The conclusion of one spectral line covering 5 sensing element is predicted.

Key words : spectrometer ; resolution ; wavelength accuracy ; photo-detector array ; spectral analysis